

1 引言

近年来，人们逐渐从信息化时代迈向了数据时代，各种数据爆炸式地增长，数据消费也在日益增多，大量的信息、知识和利润隐藏在这些数据中。如何更有效地利用这些数据，已经成为这个时代下人们共同探索的问题之一。

在这次大作业中，我将对 Adult 数据集进行全面的分析：首先探索数据集中各特征的分布信息；再划分数据集，尝试多种分类模型；最后比较这些模型在 Adult 数据集上的预测结果（分析代码均基于 Python 语言，相关工具和库包可参见附录 A.1）。

2 探索 Adult 数据集

2.1 Adult 数据集的基本信息

Adult 数据集 [1] 也称人口普查收入（Census Income）数据集，来源于美国 1994 年的人口普查数据库，可以作为二分类数据集，用来预测居民年收入是否超过 50K\$，其基本信息可参见表 1。

表 1: Adult 数据集的基本信息

属性	值	属性	值
数据集特征	多变量	相关应用	分类
实例数	48842	捐赠日期	1996.5.1
领域	社会	是否有缺失值	有
属性特征	类别型或整数	官网访问次数	1188850
属性数目	14		

Adult 数据集的每个实例包含 14 个属性，其含义、数据类型、取值范围等基本信息见表 2。

表 2: Adult 数据集的基本信息

特征名	含义	数据类型	类别数
age	年龄	整数	-
workclass	工作类型	类别型	8
fnlwgt	序号	整数	-
education	教育程度	类别型	16
education-num	受教育时间	整数	-
marital-status	婚姻状况	类别型	7
occupation	职业	类别型	14
relationship	家庭关系	类别型	6
race	种族	类别型	5
sex	性别	类别型	2
capital-gain	资本收益	整数	-
capital-loss	资本损失	整数	-
hours-per-week	每周工作小时数	整数	-
native-country	原籍	类别型	41

2.2 数据预处理

我首先使用 `pandas` 库读取 `Adult` 数据集，将其存储为 `pandas` 库中的 `DataFrame` 格式，随机打印出其中几个实例，对该数据集进行初步的观察，结果如下。

1	age	work_class	fnlwgt	education	education_num	marital_status
2	24	Private	269799	Assoc-voc	11	Never-married
3	35	?	169809	Bachelors	13	Married-civ-spouse
4	51	Private	257126	10th	6	Married-civ-spouse
5	72	Private	107814	Masters	14	Never-married
6	33	Private	205950	HS-grad	9	Never-married
7						
8	occupation	relationship	race	sex	capital_gain	
9	Exec-managerial	Not-in-family	White	Male	0	
10	?	Husband	White	Male	0	
11	Craft-repair	Husband	White	Male	0	
12	Prof-specialty	Not-in-family	White	Male	2329	
13	Other-service	Own-child	White	Male	0	
14						
15	capital_loss	hours_per_week	native_country	income		
16	0	40	United-States	<=50K.		
17	0	20	United-States	<=50K		
18	0	40	United-States	<=50K.		
19	0	60	United-States	<=50K		
20	0	40	United-States	<=50K		

从以上的初步观察可以得知，`Adult` 数据集存在数据缺失的情况（如第 3 行和 10 行的“？”），我对整个数据集进行统计后，发现数据集中共有 3620 个实例存在缺失值，而其中 2799 个实例的缺失值多于 1 个（表 3）。同时，我发现分类目标（`income`）的部分值存在歧义，“<=50K.”与“<=50K”属于同类，却被赋上不同标签，在后续预处理过程中（3.3.3 小节）我会进行处理。

表 3: `Adult` 数据集缺失值分布

	无缺失值	缺失 1 个特征	缺失 2 个特征	缺失 3 个特征
实例数	45222	821	2753	46

考虑到数据集中存在缺失值的实例数较少（仅占总数的 7.41%），且缺失的均为类别型变量，若用一般的方式填补会带来较大的偏差，因此我选择将这些实例直接删除，清理缺失值后的 `Adult` 数据集包含 45222 个实例，虽然由于删除数据导致 `workclass` 特征减少了一类（`Never-worked`），但相应的实例只有 10 个，可以忽略不计。

2.3 `Adult` 数据集中各特征的分布

对 `Adult` 数据集进行检查和清理后，我开始探索 `Adult` 数据集中各特征的分布，我将数值型特征和类别型特征分别处理：对于数值型特征，我主要关注其数字特征（如均值，方差等）及分布密度；对于类别型特征，我主要关注其具体的分布情况。

2.3.1 数值型特征的分布

Adult 数据集中的数值型特征为: age, fnlwgt, education-num, capital-gain, capital-loss 以及 hours-per-week。我首先统计其均值、标准差等数字特征, 相应结果如表 4 所示。

表 4: Adult 数据集数值型特征的数字特征

特征名	均值	标准差	最大值	最小值	上四分位数	下四分位数
age	38.548	13.218	90.000	17.000	47.000	28.000
fnlwgt	18976.470	10563.920	1490400.000	13492.000	237926.000	117388.200
education-num	10.118	2.553	16.000	1.000	13.000	9.000
capital-gain	1101.430	7506.430	99999.000	0.000	0.000	0.000
capital-loss	88.595	404.956	4356.000	0.000	0.000	0.000
hours-per-week	40.938	12.008	99.000	1.000	45.000	40.000

上表的数据大致反映了各特征的分布情况, 为更加直观地探索各数值型特征的分布趋势, 我作出了相应的概率核密度分布图 (高斯核), 见图 1。

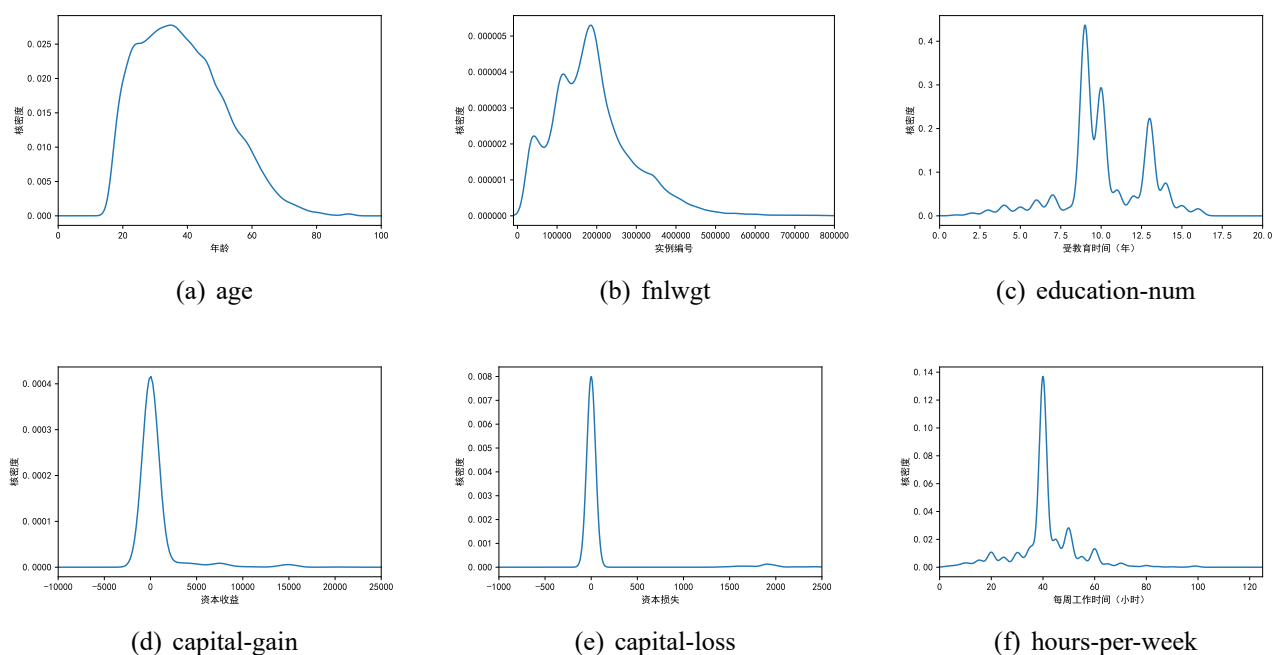


图 1: Adult 数据集数值型特征概率核密度分布

容易看出, Adult 数据集的 6 个数值型特征接近于正态分布。通过进一步的观察, 我发现 capital-gain 和 capital-loss 这两个特征的大部分取值均分布在 0 附近, 仅通过概率核密度图无法了解两特征其余取值的分布情况。为更精确、详细地探索其分布, 我做出了两特征对数值 ($\log(x+1)$) 下相应的直方图 (图 2)。

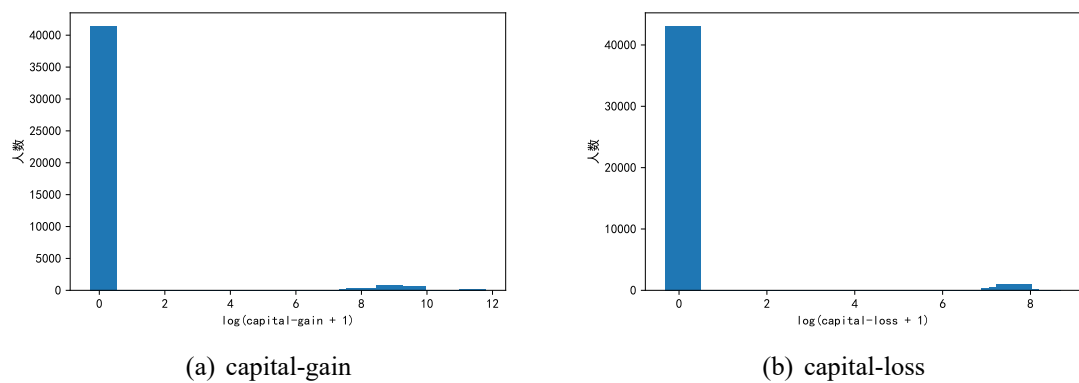


图 2: capital-in 和 capital-out 的分布直方图

2.3.2 类别型特征的分布

Adult 数据集中的类别型特征包含: workclass, education, marital-status, occupation, relationship, race, sex 以及 native-country。我将其分布表示为条形图或饼图 (图 3, 4)。各特征中包含的详细类名已记录于附录 A.2.2 中。

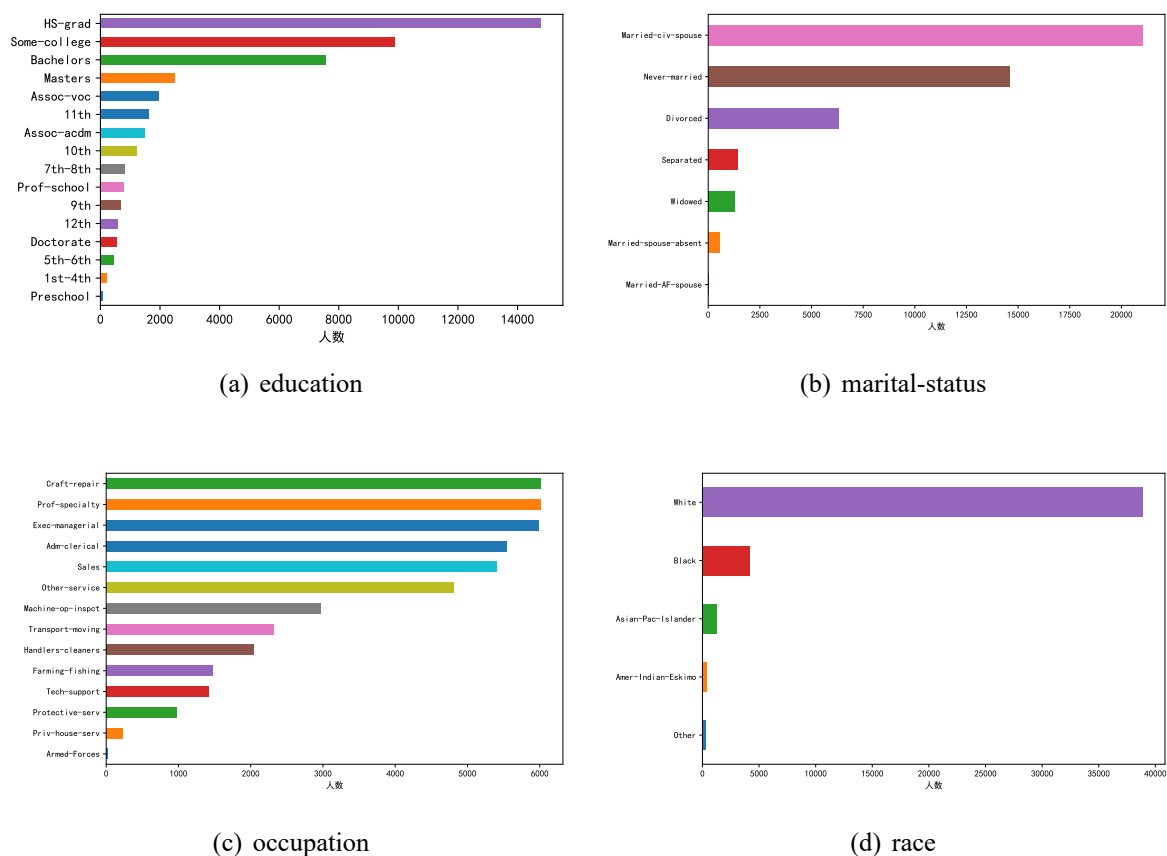


图 3: Adult 数据集类别型特征分布条形图

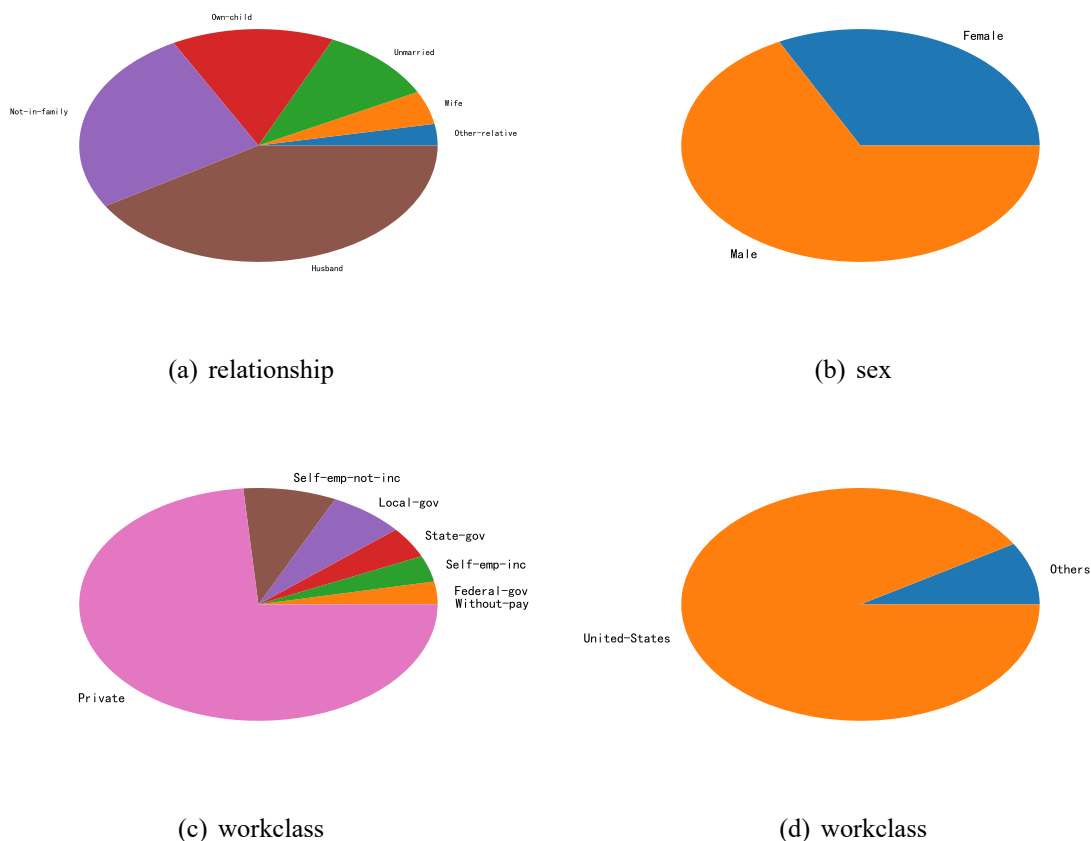


图 4: Adult 数据集类别型特征分布饼图（由于 native-country 包含的类数较多，因此除 United-States 外国籍的分布见附录 A.2.1）

2.4 Adult 数据集中各特征的相关性

探索完 Adult 数据集中各特征的分布后，我开始探索特征之间的相关性，

3 划分数据集并构造分类模型

探索完 Adult 数据集中各特征的分布和相关性后，我开始对其进行训练集和测试集的划分并构造一系列分类模型。

3.1 划分数据集

对数据集的划分一般有两种方法：一是直接按照一定的比例将数据划分为训练集和测试集（需保证训练集和测试集中的类分布大致相同）；二是使用分层交叉验证，将数据随机等分为 k 个不相交子集，执行 k 次训练与测试，根据 k 次迭代的平均表现评价模型的性能。

本次作业中，为使评价结果更加精确，我主要使用分层交叉验证方法划分数据集，只在训练基线分类模型（baseline）时使用直接划分训练集和测试集的方法。

3.2 构造分类模型

在机器学习领域，用于分类的算法种类繁多，基本的分类算法包括了逻辑回归（Logistic Regression）、K 近邻（KNN）、决策树、支持向量机（SVM）以及多层感知机（MLP）等。考虑到

Adult 数据集的特征维数并不高，且分类目标简单（二分类），我在本次作业中选择使用决策树、SVM 以及 MLP 三种分类模型（图 5）。除使用单独模型进行分类外，我尝试应用了模型集成的方法以提高相应的分类效果。

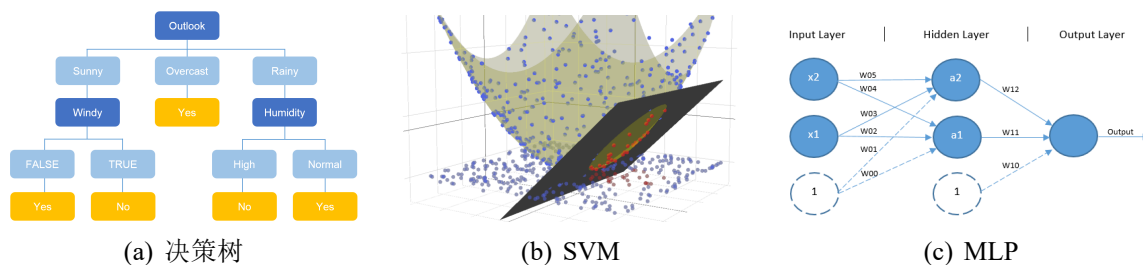


图 5: 决策树、SVM 和 MLP 模型的直观表示

3.3 数据预处理

在进行正式的分类之前，我对 Adult 数据集的特征和分类目标进行了一些预处理，以方便分类模型的训练。

3.3.1 Z-score 标准化（规范化）

一般地，Z-score 标准化有如下形式：

$$y = \frac{x - \mu}{\sigma} \quad (1)$$

其中 μ 和 σ 分别代表原数据的均值和标准差。

对于分类问题的数值型特征，经 Z-score 标准化后符合标准正态分布，即 $N(0, 1)$ ，可以有效避免因数值过大导致的模型偏差，并能够加快模型的学习速率，这些优势在 SVM 和 MLP 等模型中表现得更加明显。

除此之外，2.3.1 小节的结果表明，Adult 数据集里的数值型特征大多近似服从正态分布，在这个条件下，Z-score 标准化能够取得更良好的效果。若特征的分布与正态分布相差较大，则 Z-score 标准化反而会破坏原数据的分布，造成额外的偏差。

3.3.2 向量化

Adult 数据集中存在 8 个类别型特征，且这些特征的类别之间并无大小关系，如性别的男女之间不存在大小的区别。为方便模型的训练，我将这些特征从字符串转化为 one-hot 向量。经过向量化处理后的数据，每个实例包含 104 维特征。

3.3.3 分类目标修正

Adult 数据集的分类目标为居民收入，分为两类： $\leq 50K\$$ 以及 $> 50K\$$ 。而数据集中有些实例的分类目标后多了“.”，如变为“ $\leq 50K.$ ”，直接使用原数据训练将导致分类目标变为 4 类。因此，我将分类目标转化为 -1 和 1，分别表示 $\leq 50K\$$ 和 $> 50K\$$ 。另外值得注意的一点是 Adult 数据集包含 34014 个负样本（ $\leq 50K$ ），而仅有 11208 个正样本。

3.4 分类性能评价标准

对于分类问题，评价分类性能的标准一般有 3 个：精确度（precision），召回率（recall）以及 f1-score。其在二分类问题中的定义如下。

假设二分类问题的结果为：

	正类	负类
分类正确	TP	FP
分类错误	FN	TN

则精确度、召回率和 f1-score 分别定义为

$$P = \frac{TP}{TP + FP}$$

$$R = \frac{TP}{TP + FN} \quad (2)$$

$$F1 = \frac{2PR}{P + R}$$

一般地，在大规模的数据集下，精确度和召回率会相互制约，出现一高一低的现象，而 f1-score 可以兼顾二者，有效减少因一者过大带来的误差。因此，在本次作业的实验中，我主要以 **f1-score** 作为分类性能的主要评价标准，精确度和召回率则在训练基线模型时作为参考标准。

4 各分类模型的预测结果比较

4.1 基线模型（baseline）

为方便之后的比较，我首先使用 sklearn [2] 中的默认参数，不使用标准化，构造了三个基线模型，以及一个空模型（按相等概率随机预测），参见表 5 和表 6。

表 5: 基线模型在 Adult 数据集上的性能（0.8-0.2 比例的训练集-测试集分割）

	精确度（precision）	召回率（recall）	f1-score	时间（秒）
决策树	0.81	0.81	0.81	0.25
SVM	0.76	0.83	0.76	1044.22
MLP	0.78	0.80	0.79	0.59
空模型	0.72	0.52	0.57	0.07

表 6: 基线模型在 Adult 数据集上的性能（5 折分层交叉验证）

	精确度（precision）	召回率（recall）	f1-score	时间（秒）
决策树	0.80	0.80	0.80	4.41
SVM	0.83	0.83	0.83	4491.21
MLP	0.81	0.83	0.80	11.82
空模型	0.72	0.50	0.56	0.19

4.2 决策树模型

在本节中，我将使用网格搜索（Grid Search）对决策树模型的分类效果进行评估（5 折交叉验证），搜索的参数及范围参见表 7。

表 7: 对决策树模型网格搜索的参数及范围

参数	含义	类型（范围）
criterion	特征选择的度量标准	gini, entropy
max_depth	树的最大深度	正整数
max_features	寻求最佳划分时 要考虑的特征数目	总特征数或其平方根 或其以 2 为底的对数值
presort	是否对数据预先排序	布尔值
splitter	结点划分策略	best, random

经过网格搜索后，我得到的最佳决策树模型的参数为：criterion: entropy, splitter: best, max_features: 总特征数, max_depth: 9, presort: True；该模型在测试集上的平均 f1-score 为 0.83。

最终通过网格搜索筛选出的最佳决策树模型可视化见图 6。

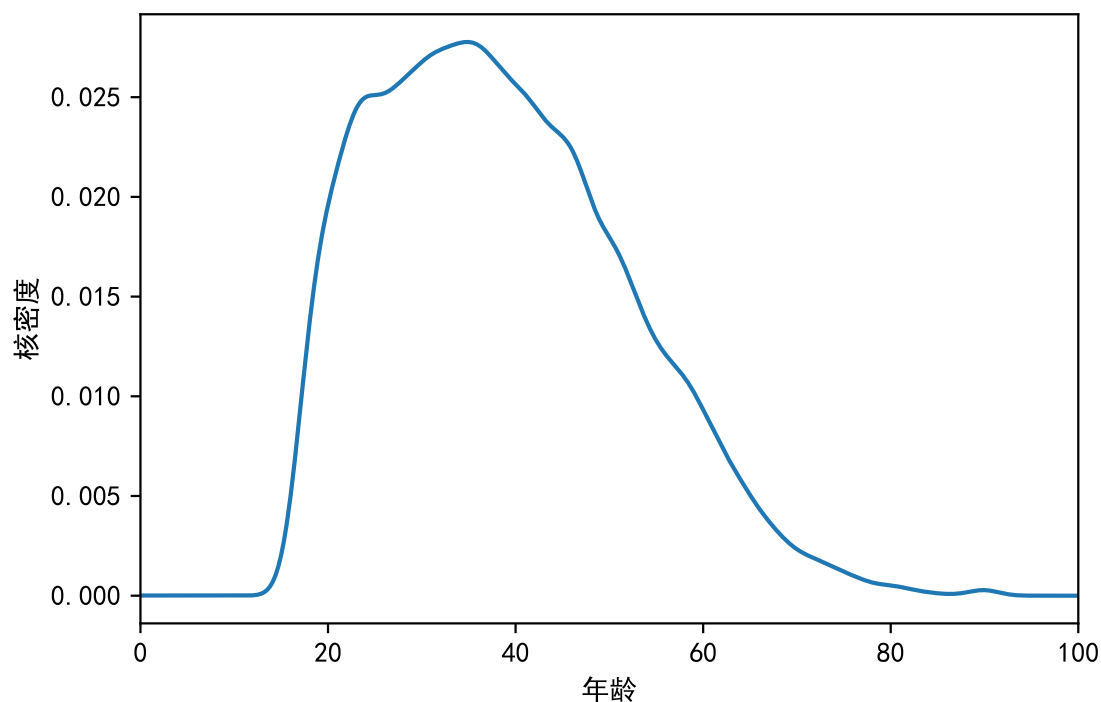


图 6: 最佳决策树模型可视化

4.3 SVM

从表 5 和表 6 来看，SVM 的二分类能力并没有完全展现出来，并且难以收敛。在这一节中，我将尝试改变 SVM 模型的多个关键参数，尽可能改善其表现。

4.3.1 核函数

原始的 SVM 属于线性分类器，核函数的引入将 SVM 的应用推广到了非线性数据上。不同的核函数所需要的计算量和性能均有较大差别，我在 Adult 数据集上尝试应用四种常用的核函数：rbf 核函数，多项式核函数 (poly kernel)，sigmoid 核函数以及线性核函数，各模型相应的表现见图 7 及图 ?? (基于 5 折交叉验证)。

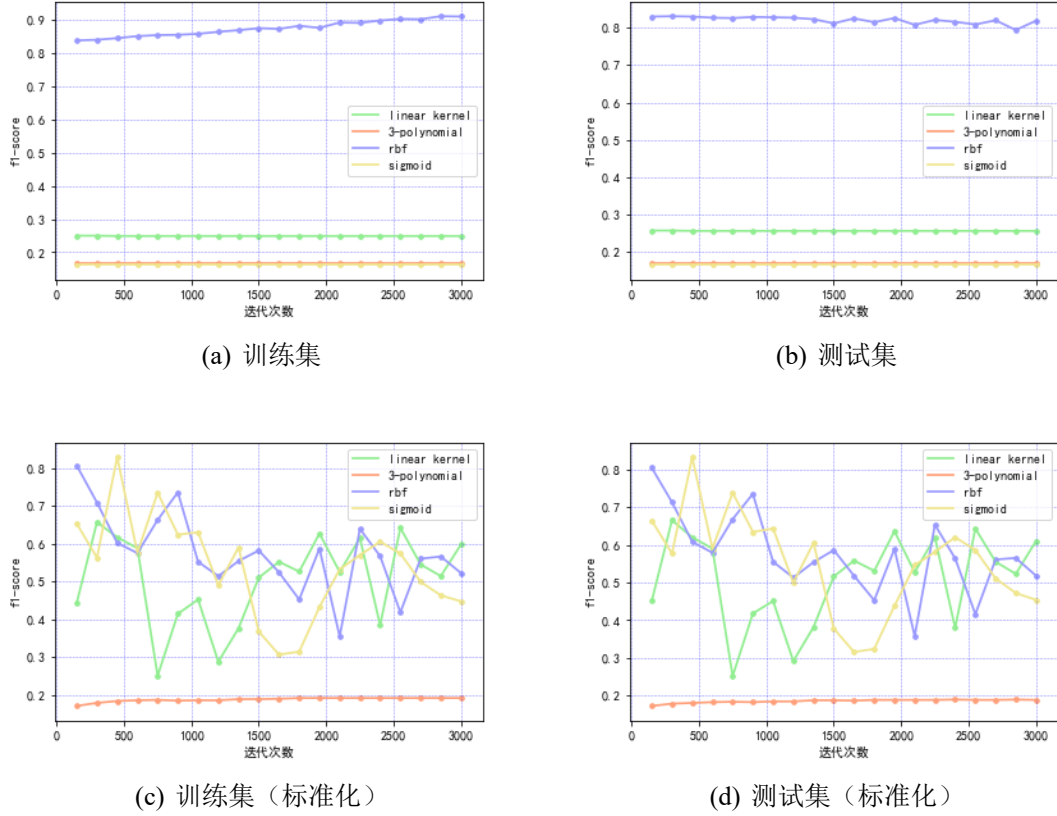


图 7: 不同核函数下 SVM 模型的分类表现

从上图中容易看出，对于未经 Z-score 标准化后的数据，SVM 模型在使用 rbf 核时分类效果较佳，而其余核函数的分类效果极差，甚至低于空模型；而对于 Z-score 标准化后的数据，linear 和 sigmoid 核函数的表现略有提高，但训练均极不稳定，向空模型的方向收敛。因此之后的实验均基于未 Z-score 标准化后的数据使用 rbf 核进行。

4.3.2 惩罚系数

SVM 在面对轻微的线性不可分数据时，可以通过引入惩罚系数 C ，将原有的优化目标

$$L = \frac{1}{2}w^T w \quad (3)$$

变为

$$L = \frac{1}{2}w^T w + C \sum_{n=1}^N \xi_n, \quad (4)$$

适当的惩罚系数可以极大地改善 SVM 的分类性能。我使用类似于网格搜索的方式，遍历了各数量级的 C 取值，相应的结果可参见图 8。

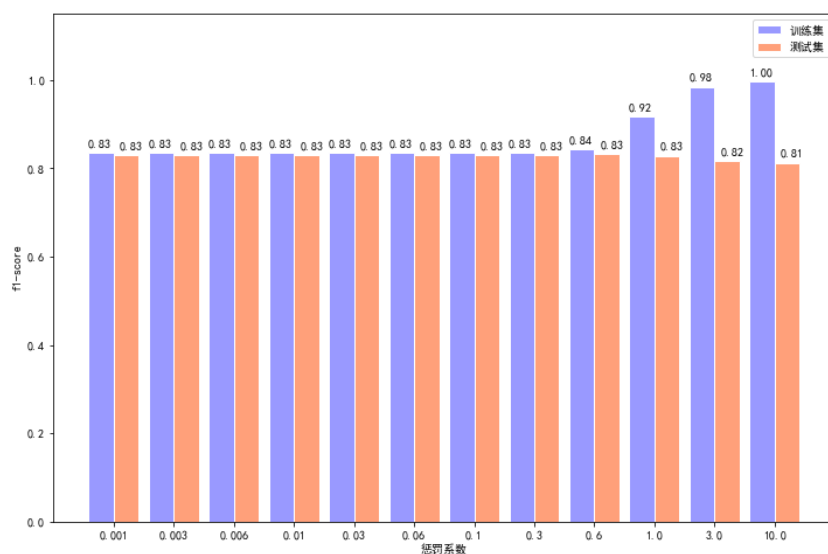


图 8: 不同惩罚系数下 SVM 模型的分类表现

4.3.3 Gamma (γ)

rbf 核的数学表达形式为:

$$K(x_i, x_j) = \exp(-\gamma \|x_i - x_j\|^2), \gamma > 0 \quad (5)$$

γ 是 rbf 核函数的一个重要参数, 在 `sklearn` 中, 其默认值为: $\frac{1}{\text{特征总维数}}$, 在 Adult 数据集上即为 $1/104 = 0.096$ 。我利用类似网格搜索的方式探索了各数量级下的 γ 对应的 SVM 模型的分类表现 (表 8)。

表 8: 不同数量级的 γ 对应的 SVM 模型的分类表现

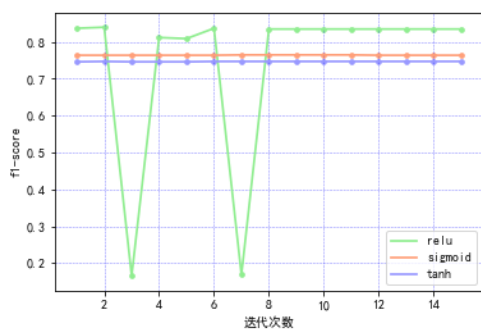
γ	训练集 f1-score	测试集 f1-score
----------	--------------	--------------

4.4 MLP

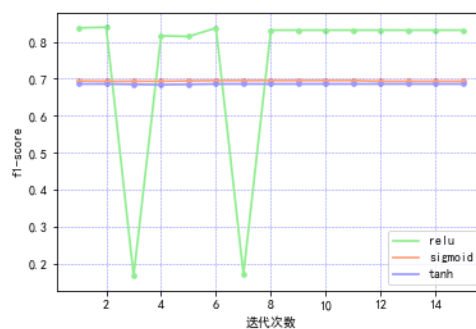
从 MLP 基线模型 (表 5, 6) 的性能分析, MLP 的性能相比决策树模型稍逊。我认为较大的原因在于 MLP 模型的默认参数并不适合 Adult 数据集, 因此, 在本节中, 我将对 MLP 中不同的组件 (激活函数, 优化算法等) 对其在 Adult 数据集上分类性能的影响进行探究。

4.4.1 激活函数

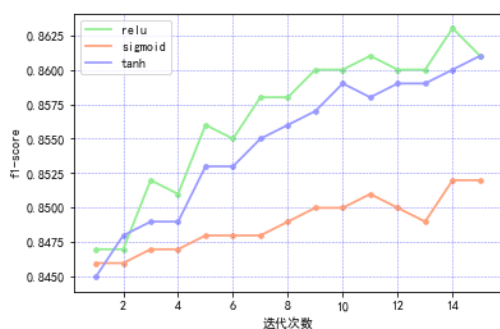
激活函数作用于 MLP 隐藏层中的每个神经元上, 为 MLP 引入非线性因素, 若缺少激活函数, 神经网络的表达能力将极其有限。因此, 激活函数是整个 MLP 中重要的组件之一。常用的激活函数包括 `relu` [3], `tanh` 以及 `sigmoid` 等, 相应的预测表现见图 9。



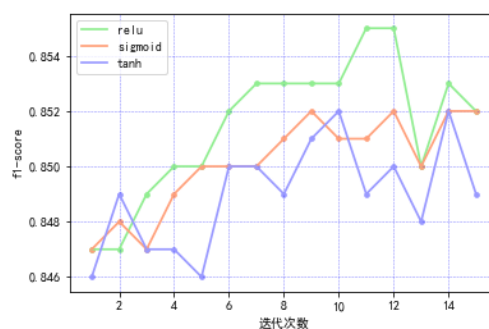
(a) 训练集



(b) 测试集



(c) 训练集（标准化）



(d) 测试集（标准化）

图 9: 不同激活函数下 MLP 模型的分类表现

上图结果表明，相比于 sigmoid 和 tanh，relu 激活函数在 Adult 数据集下的分类表现更佳。同时，MLP 在经过 Z-score 标准化后的 Adult 数据集上能取得更好的分类效果，不仅提高了整体的分类 f1-score，更有效地避免了使用 relu 激活函数时进入局部最小值的情况。因此，之后 MLP 部分的实验均基于 Z-score 标准化后的 Adult 数据集进行。

4.4.2 优化算法

优化算法作用于 MLP 更新参数时，对于同样的梯度分布，不同的优化算法的优化路径存在着极大的差别，图 10 形象地说明了这一点。因此，探究不同优化算法下 MLP 的分类性能是很有必要的，详细结果可参见图 11。

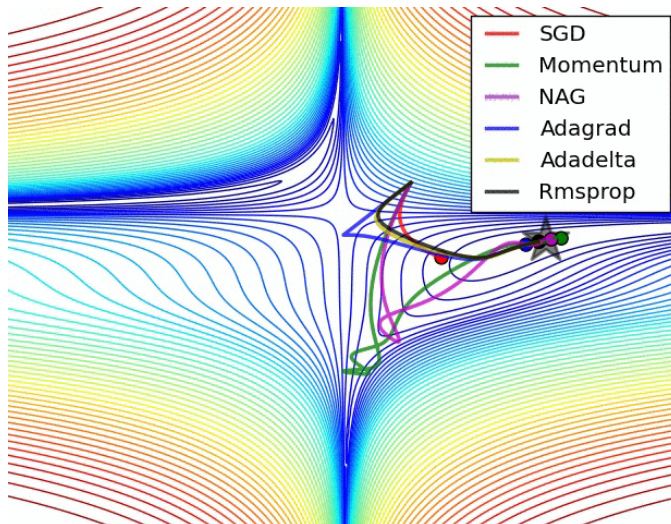


图 10: 不同优化算法的优化效果对比 [4]

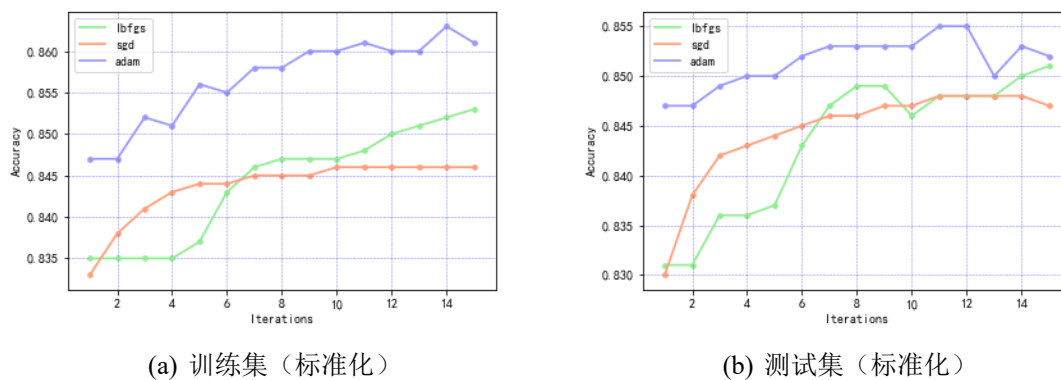


图 11: 不同优化算法下 MLP 模型的分类表现

4.4.3 学习率

在 MLP 的参数更新过程中，学习率决定了参数更新的速率，过大的学习率会导致模型进入局部最小值，而学习率过小则会减缓模型的学习速度。在本节中，我采用类似于 4.3.2 小节的方式，对基于 xxx 优化算法的 MLP 模型在不同学习率下的分类效果进行探索（图 12）。

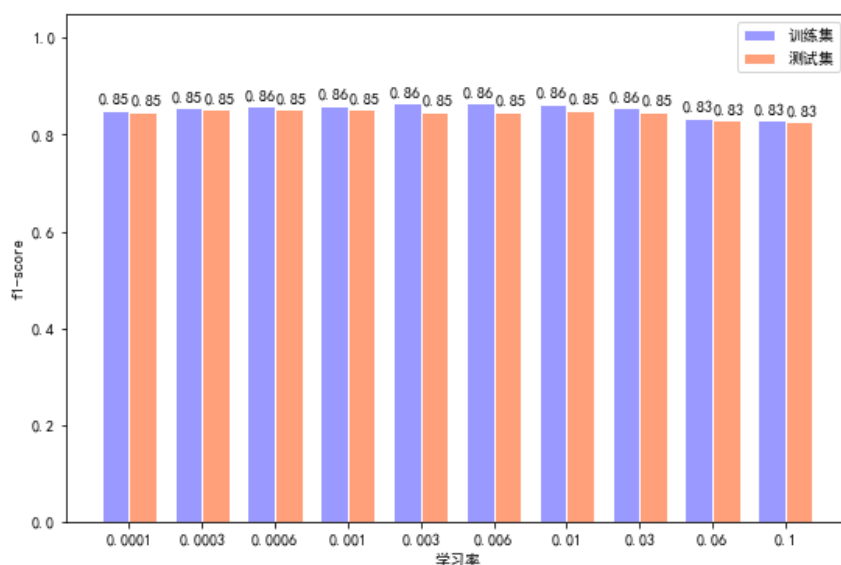


图 12: 不同学习率下 MLP 模型的分类表现

4.5 模型集成

从以上几节的结果分析，决策树模型在 Adult 数据集上的分类效果弱于 SVM 和 MLP，因此，我尝试使用 bagging 和 boosting 两种模型集成的方法改善决策树模型的分类效果。结果参见图 ??。

4.6 三种分类模型效果对比

通过 4 小节的实验，我对决策树、SVM 和 MLP 三种模型在 Adult 数据集上的分类效果有了大致的了解。在本节中，我将探索三种分类模型在不同条件下对 Adult 数据集的分类效果。

4.6.1 Z-score 标准化

4.6.2 PCA

4.6.3 最佳性能对比

根据 4 与 4.6 小节的实验结果，三种模型均存在一个最佳的 f1-score 值，一定程度上代表其在 Adult 数据集上分类能力的极限（由于模型的参数空间极其巨大，无法保证该值是否为全局最优，但在一定程度上能反映该模型的最佳性能），对比参见表 ??。

5 对 Adult 数据集的分析结论

Adult 数据集是一个中等规模，存在少部分缺失值的二分类数据集，共 48842 个实例，每个实例包含 14 个特征，其中 8 个为类别型特征，6 个为数值型特征。各类别型特征的分布差异较大，数值型特征的分布近似于正态分布。

我使用了决策树、SVM 和 MLP 三种分类模型对 Adult 数据集进行分类，对模型的参数进行微调后，xxx 的分类效果最佳，最高的 f1-score 可达到 xxx，而 xxx 模型所消耗的时间最少，平均不到 xxx 秒。

A 附录

A.1 作业中使用的工具及库包

本次作业我所使用的编程语言为 Python [5]，编辑环境以 jupyter notebook [6] 为主。作业中我使用的库包见表 9。

表 9: 本作业中使用的库包

库包名	用途
numpy [7]	处理数据，数值计算
pandas [8]	读取数据，绘图，处理数据
matplotlib [9]	绘图
scipy [10]	数值计算
scikit-learn [2]	分类模型的构造和运算

A.2 Adult 数据集特征分布补充资料

A.2.1 native-country 特征的详细分布

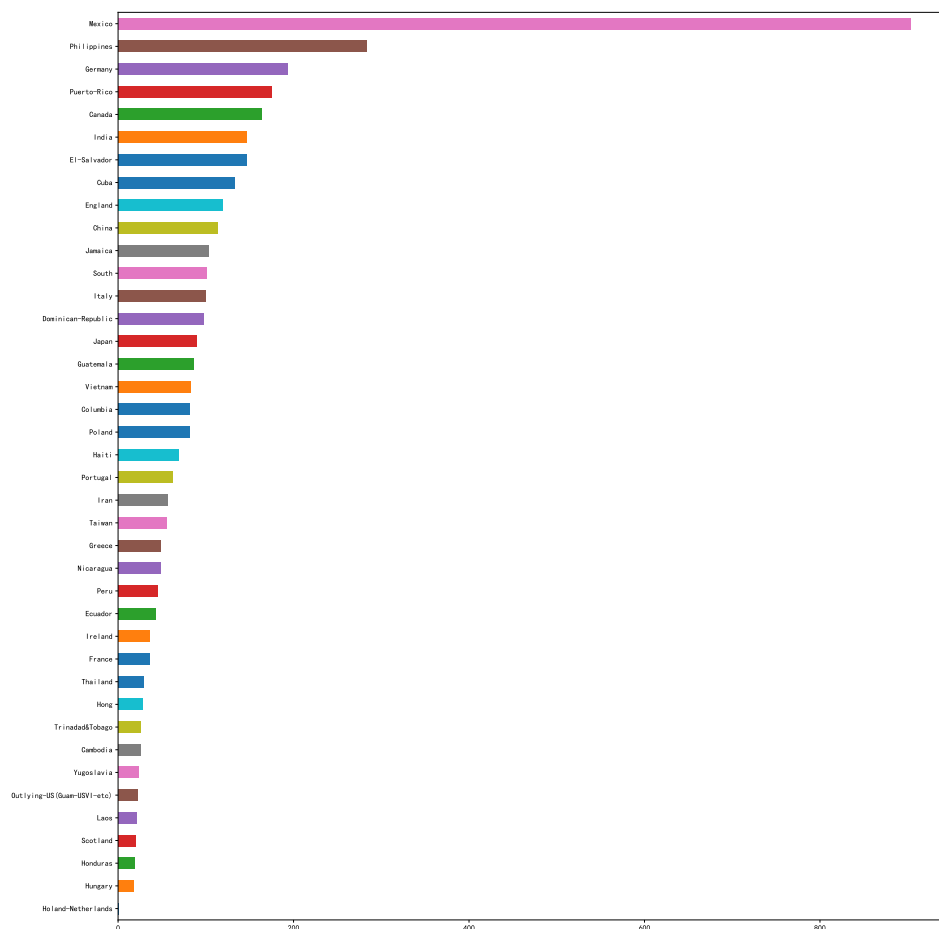


图 13: Adult 数据集 native-country 特征分布（除 United-States）

A.2.2 各类别型特征下的详细类名

1. **workclass** Private, Local-gov, Self-emp-not-inc, Federal-gov, State-gov, Self-emp-inc, Without-pay, Never-worked;
2. **education** 11th, HS-grad, Assoc-acdm, Some-college, 10th, Prof-school, 7th-8th, Bachelors, Masters, Doctorate, 5th-6th, Assoc-voc, 9th, 12th, 1st-4th, Preschool;
3. **marital-status** Never-married, Married-civ-spouse, Widowed, Divorced, Separated, Married-spouse-absent, Married-AF-spouse;
4. **occupation** Machine-op-inspct, Farming-fishing, Protective-serv, Other-service, Prof-specialty, Craft-repair, Adm-clerical, Exec-managerial, Tech-support, Sales, Priv-house-serv, Transport-moving, Handlers-cleaners, Armed-Forces;
5. **relationship** Own-child, Husband, Not-in-family, Unmarried, Wife, Other-relative;
6. **race** Black, White, Asian-Pac-Islander, Other, Amer-Indian-Eskimo;
7. **sex** Male, Female;
8. **native-country** United-States, Cuba, Jamaica, India, Mexico, Puerto-Rico, Honduras, England, Canada, Germany, Iran, Philippines, Poland, Columbia, Cambodia, Thailand, Ecuador, Laos, Taiwan, Haiti, Portugal, Dominican-Republic, El-Salvador, France, Guatemala, Italy, China, South, Japan, Yugoslavia, Peru, Outlying-US(Guam-USVI-etc), Scotland, Trinidad&Tobago, Greece, Nicaragua, Vietnam, Hong, Ireland, Hungary, Holand-Netherlands.

参考文献

- [1] D. Dheeru and E. Karra Taniskidou, “UCI machine learning repository,” 2017.
- [2] “scikit-learn.” <http://scikit-learn.org/stable/>.
- [3] V. Nair and G. E. Hinton, “Rectified linear units improve restricted boltzmann machines,” in *Proceedings of the 27th international conference on machine learning (ICML-10)*, pp. 807–814, 2010.
- [4] “Cs231n: Convolutional neural networks for visual recognition.” <http://cs231n.github.io/neural-networks-3/>.
- [5] “Python.” <https://www.python.org/>.
- [6] “Jupyter notebook.” <http://jupyter.org/>.
- [7] “Numpy.” <http://www.numpy.org/>.
- [8] “Pandas.” <http://pandas.pydata.org/>.
- [9] “matplotlib.” <https://matplotlib.org/>.
- [10] “scipy.” <https://www.scipy.org/>.